

Листок 8. Стационарная теория возмущений

Все задачи в этом листке, кроме отмеченных звездочкой, являются обязательными.
Крайний срок сдачи письменных решений — 14 марта.

1. Квантовомеханическая система состоит из двух одинаковых частиц спина $1/2$. Пространственные степени свободы частиц "заморожены" (скажем, частицы занимают соседние места в кристаллической решетке). Невозмущенный гамильтониан их взаимодействия имеет вид

$$H^0 = \frac{\vec{S}^2}{2I}.$$

Здесь $\vec{S} = \vec{s} \otimes Id + Id \otimes \vec{s}$ — суммарный спин системы двух частиц; $s_i = \frac{1}{2}\sigma_i$ — декартовы компоненты оператора спина каждой из частиц. I — параметр интенсивности взаимодействия спинов, аналогичный моменту инерции для вращающегося тела.

Эта система помещается в постоянное, но неоднородное магнитное поле, дающее возмущающую поправку в гамильтониан

$$H = H^0 + \varepsilon V, \quad \varepsilon = \mu \mathcal{H}, \quad V = s_3 \otimes Id + Id \otimes s_3.$$

Это значит, что магнитное поле имеет постоянную величину \mathcal{H} и направлено вдоль оси $0z/0y$ в месте нахождения первой/второй частицы. μ — параметр магнитной восприимчивости частиц.

Считая ε достаточно малым, рассчитайте

- (а) Первую ненулевую поправку к основному (низшему) уровню энергии системы.
(б) Первую поправку к остальным уровням энергии.
2. Найдите поправку первого порядка к энергии основного состояния атома водорода с учетом конечности размеров ядра. Ядро представьте в виде равномерно заряженной сферы радиуса R .

Напомним, что потенциальная энергия электрона в поле равномерно заряженной сферы имеет вид

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r}, & r > R, \\ -\frac{e^2}{R} = \text{const}, & r \leq R. \end{cases}$$

Волновая функция основного состояния атома водорода:

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp(-r/a_0), \quad \text{где } a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ см.} \quad (1)$$

Здесь e , m_e — заряд и масса электрона, $-e$ — заряд сферы.

Сравните поправку с энергией основного состояния $E_{\text{осн}} = -\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2}$, учитывая что характерный размер ядра $R \simeq 10^{-13}$ см.

3. Атом водорода помещен в постоянные однородные сонаправленные электрическое и магнитное поля напряженности $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$. Рассмотрим поведение первого возбужденного (следующего за основным) уровня энергии атома водорода, который 4-кратно вырожден в отсутствие внешних полей ($\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{H}} = 0$).

Напомним, что значения энергии стационарных состояний атома водорода даются формулой $E_n = -\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2 n^2}$, а, значит, энергия первого возбужденного уровня $E_2 = E_{\text{осн}}/4$. Четыре волновых функции $\psi_{n=2,\ell,m}(\vec{r})$ этого уровня имеют вид

$$\begin{aligned}\psi_{2,0,0}(r) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi a_0^3}} 2^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right), \\ \psi_{2,1,m}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{4! a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_1^m(\theta, \phi), \quad m = 0, \pm 1, \\ \text{где} \quad Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^1 = -(Y_1^{-1})^* = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}.\end{aligned}$$

Возмущающие поправки к оператору энергии электрона, вызванные электрическим и магнитным полями, имеют вид

$$\begin{aligned}V_{\text{эл}} &= e \vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}} = e \mathcal{E} r \cos \theta, \\ V_{\text{магн}} &= -\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{H}} = \frac{e}{2m_e c} \vec{L} \cdot \vec{\mathcal{H}} = \frac{e\hbar}{2m_e c} \mathcal{H} \left(-i \frac{\partial}{\partial \phi}\right)\end{aligned}\tag{2}$$

Здесь $\vec{\mu}$ – орбитальный магнитный момент электрона, \vec{L} – его угловой момент. В правых частях равенств приведены выражения операторов в сферической системе координат, ось Oz которой сонаправлена векторам $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$.

Покажите, что в первый возбужденный уровень под действием электрического и магнитного полей расщепляется на четыре, вообще говоря, невырожденных уровня. Рассчитайте поправки первого порядка к энергиям этих уровней. В каких ситуациях вырождение частично сохраняется?

NB. Явления расщепления энергетических уровней атомов в электрическом и магнитном полях называются, соответственно, эффектами Штарка и Зеемана.

4.* Квадратичный эффект Штарка. Рассчитайте первую ненулевую поправку к энергии основного состояния атома водорода (1) под действием постоянного однородного электрического поля (2).

Указание.

Убедитесь, что поправка первого порядка к энергии основного состояния ($\psi_{100}, V_{\text{эл}}\psi_{100}$) равна нулю. Для вычисления поправки второго порядка воспользуйтесь соотношением

$$\left[H^0, \Omega\right] \psi_{100} = \frac{e}{a_0 \mathcal{E}} V_{\text{эл}} \psi_{100},$$

где $H^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \frac{e^2}{r}$ – невозмущенный гамильтониан атома водорода, а вспомогательный оператор Ω имеет вид

$$\Omega = \left(1 + \frac{r}{2a_0}\right) z = \left(1 + \frac{r}{2a_0}\right) r \cos \theta.$$

Используйте эту формулу для замены одного из операторов $V_{\text{эл}}$ в формуле для поправки второго порядка, и примените свойство полноты набора функций $\psi_{n,\ell,m}$ для упрощения полученного выражения.